



TITLE:

## 9. Bose量子結晶について(基研長期研究計画「量子固体」,研究会報告)

AUTHOR(S):

上羽, 牧夫

---

CITATION:

上羽, 牧夫. 9. Bose量子結晶について(基研長期研究計画「量子固体」,研究会報告). 物性研究 1977, 28(6): F38-F45

ISSUE DATE:

1977-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89399>

RIGHT:

参 考 文 献

- 1) J. Wilks : The Properties of Liquid and Solid Helium, (Clarendon Press, Oxford, 1967).
- 2) R. A. Guyer : Solid State Phys. **23** (1969) 413.
- 3) 比企能夫, 鶴岡富士雄 : 日本物理学会誌 **31** (1976) 268.
- 4) H. Suzuki : J. Phys. Soc. Japan **35** (1973) 1472, **42** (1977) 1865.
- 5) R. Wanner, I. Iwasa and S. Wales : Solid State Comm. **18** (1976) 853.
- 6) A. V. Granato and K. Lüke : J. Appl. Phys. **27** (1956) 583, 789.
- 7) Y. Hiki and F. Tsuruoka : Proc. 14th Intern. Conf. on Low Temp. Phys. (North-Holland, Amsterdam, 1975), Vol. 1, p. 479.
- 8) Y. Hiki and F. Tsuruoka : Phys. Letters **56A** (1976) 484.
- 9) J. P. Hirth and J. Lothe : Theory of Dislocations (McGraw-Hill Book Company, New York, 1968) p. 247.
- 10) A. D. Brailsford : J. Appl. Phys **43** (1972) 1380.
- 11) T. Ninomiya : J. Phys. Soc. Japan **36** (1974) 399.
- 12) B. V. Petukhov and V. L. Pokrovski : Soviet Phys. —JETP **36** (1973) 336.

Bose 量子結晶について

名大理 上 羽 牧 夫

§ 1. はじめに

固体における量子性は零点振動が大きいことにまずあらわれるが、更に粒子のいれかわりがおこるような場合には固体を構成する粒子の統計が現象に反映する。Fermi 粒子からなる固体ならばスピン秩序が発生するし、Bose 粒子ならば超流動相の存在が問題となる。

このことを最初にとりあげたのは Andreev と Lifshitz<sup>1)</sup>である。大きな量子効果のために結晶内の点欠陥(空隙子点, 不純物など)は局在化せずにバンドをつくる。このバンドの幅が大きくてバンドの底のエネルギー・ギャップがなくなると巨視的な数の格子欠陥が基底状態で存在する(零点ディフェクトン)。これが Bose凝縮した状態で超流動固

体が期待される。

Chester<sup>2)</sup> は Jastrow 型の波動関数をもちいた確率分布が、ある 2 体のポテンシャルによる古典的な Gibbs 座標分布関数に対応することに着目した。

$$\begin{aligned}\Psi^2 &= \exp \left\{ - \sum_{i \neq j} u(r_{ij}) \right\} \\ &\equiv \exp \left\{ - \sum_{i \neq j} V(r_{ij}) / k_B T \right\}\end{aligned}\quad (1)$$

Jastrow 波動関数が Bose 凝縮体をもつことは証明されており、対応する古典系には結晶秩序が存在することが期待されるので、両者の共存はありうる。

ここでは、固体状態を表現するのに適当と思われる格子模型にもとづいて超流動密度励起スペクトルなどを考え (§2)，のちに 2, 3 の問題について簡単にレビューする (§3)。

## §2. 格子模型

各格子点に局在化した 1 粒子波動関数  $\phi^n(\mathbf{x}-\mathbf{R}_i)$  で場の演算子を展開し、基底状態の  $\phi$  に対応するもの以外はすべて

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_i \phi(\mathbf{x}-\mathbf{R}_i) a_i \quad (2)$$

で結晶状態を表現する。  $a_i$  は Bose 演算子である。適当な近似で Hamiltonian は

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} t_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i \quad (3)$$

$$t_{ij} = \langle \mathbf{R}_i | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 | \mathbf{R}_j \rangle, \quad v_{ij} = \langle \mathbf{R}_i | \langle \mathbf{R}_j | V(\mathbf{x}-\mathbf{x}') | \mathbf{R}_j \rangle | \mathbf{R}_i \rangle$$

$$| \mathbf{R}_i \rangle \equiv \phi(\mathbf{x}-\mathbf{R}_i)$$

と書ける。<sup>3)</sup> この Hamiltonian では格子点から格子点への粒子のとびうつりの運動はあるが、格子振動などの格子点の運動ははいっていない。そこで長波長のゆっくりとした格子の運動を考え、それを場の演算子を展開する基底を

$$\{ \phi(\mathbf{x}-\mathbf{R}_i) \} \rightarrow \{ e^{i m \dot{\mathbf{R}}_i \cdot \mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}-\mathbf{R}(t)) \} \quad (4)$$

上羽牧夫

とかえることによって一種の「境界条件」としてとりいれる。(2)のように書いたことは状態を記述する空間を制限したことになるが、今度はかわりに(4)の右側の状態に制限するのである。この新しい基底の生成消滅演算子をつかって Hamiltonian を書きかえ

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & \sum_{i,j} \langle \mathbf{R}_i(t) | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 | \mathbf{R}_j(t) \rangle a_i^\dagger a_j \\
 & + \sum_{i,j} \dot{\mathbf{R}}_j(t) \langle \mathbf{R}_i(t) | -i\hbar \nabla | \mathbf{R}_j(t) \rangle a_i^\dagger a_j \\
 & + \frac{1}{2} m \sum_i \dot{\mathbf{R}}_i^2 n_i \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle \mathbf{R}_i(t) | \langle \mathbf{R}_j(t) | V | \mathbf{R}_j(t) \rangle | \mathbf{R}_i(t) \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i \quad (5)
 \end{aligned}$$

となる。

格子点を非常に小さな速度  $\mathbf{v}$  で一様に動かした場合の流れを考えて超流動密度を定義しよう。Hamiltonian と運動量は

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_v = & \sum_{i,j} t_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i \\
 & + \mathbf{v} \cdot \sum_{i,j} \left( -i \frac{m}{\hbar} t_{ij} \mathbf{R}_{ij} \right) a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} m v^2 \sum_i n_i \\
 \equiv & \mathcal{H}_0 + \mathbf{v} \cdot \mathcal{P}_0 + \frac{1}{2} m v^2 \mathcal{N} \quad (6)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}_v = & \sum_{i,j} \left( -i \frac{m}{\hbar} t_{ij} \mathbf{R}_{ij} \right) a_i^\dagger a_j + m \mathbf{v} \sum_i n_i \\
 \equiv & \mathcal{P}_0 + m \mathbf{v} \mathcal{N} \quad (7)
 \end{aligned}$$

と書ける。ただしここで  $\mathcal{P}_0$  にあたる項は、 $\mathcal{H}_0$  による運動が連続の方程式と似た形に書けるように決めた。さて常流体密度を  $\mathcal{H}_v$  の基底状態  $|\Psi_v^0\rangle$  での運動量 (格子点を  $\mathbf{v}$  の速さで動かした時の基底状態での流れ) によって定義する。

$$\text{Nm} \frac{\rho_n}{\rho} \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \langle \Psi_v^0 | \mathcal{P}_v | \Psi_v^0 \rangle \Big|_{\mathbf{v} \rightarrow 0} \quad (8)$$

すると次のことが言える。

$$Nm \frac{\rho_n}{\rho} = \frac{\partial^2}{\partial v^2} E_v^0 \Big|_{v \rightarrow 0}, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} Nm \frac{\rho_s}{\rho} &\equiv Nm \left( 1 - \frac{\rho_n}{\rho} \right) \\ &= - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \langle \Psi_v^0 | \mathcal{D}_0 | \Psi_v^0 \rangle \Big|_{v \rightarrow 0} \end{aligned} \quad (10)$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial v^2} \langle \Psi_v^0 | \mathcal{K}_0 | \Psi_v \rangle \Big|_{v \rightarrow 0}. \quad (11)$$

(11) を使って  $\Psi_v^0$  を  $\Psi_0$  に一様な位相傾配をつけた状態として変分をすると  $\rho_s$  の表式として

$$\left( \frac{\rho_s}{\rho} \right)_{\alpha\beta} = - \frac{1}{N} \langle \Psi_0 | \sum_{ij} \frac{m}{\hbar^2} t_{ij} R_{ij}^\alpha R_{ij}^\beta a_i^\dagger a_j | \Psi_0 \rangle \quad (12)$$

がえられる。

次に長波長の励起を調べる。モデルを更に限定して、ハード・コアをもつ粒子を想定し、同じ格子点に 2 つ以上の粒子はこないとする。このことを Fermi 型の交換関係で運動学的にとりいれスピン演算子におきかえる。<sup>4)</sup>

$$\begin{aligned} a_i^\dagger &\rightarrow S_i^+, \quad a_i \rightarrow S_i^-, \quad (S_i^\pm = S_i^1 \pm S_i^2) \\ n_i &\rightarrow \frac{1}{2} + S_i^3 \end{aligned} \quad (13)$$

(5) を平均した  $\langle \Psi | \mathcal{K} | \Psi \rangle$  は系のエネルギーだが、これは平均場近似では  $R_i(t)$  と  $\langle S_i^\alpha \rangle$  の関数である。長波長の運動を考えているので連続体としてあつかうと、このエネルギー  $W$  は、 $(-\mu \sum n_i)$  の項も加えて)

$$\begin{aligned} W &= \iint t [\mathbf{R}(\mathbf{x}) - \mathbf{R}(\mathbf{y})] [S_1(\mathbf{x}) S_1(\mathbf{y}) + S_2(\mathbf{x}) S_2(\mathbf{y})] d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y} \\ &+ \frac{\rho_n}{\rho} \int \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{R}}(\mathbf{x})^2 \left[ \frac{1}{2} + S_3(\mathbf{x}) \right] d^3 \mathbf{x} \\ &+ \frac{1}{2} \iint v [\mathbf{R}(\mathbf{x}) - \mathbf{R}(\mathbf{y})] \left[ \frac{1}{2} + S_3(\mathbf{x}) - \frac{\rho_s}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{R}(\mathbf{x}) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{1}{2} + S_3(\mathbf{y}) - \frac{\rho_s}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{R}(\mathbf{y}) \right] d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y} \\ & - \mu \int \left[ \frac{1}{2} + S_3(\mathbf{x}) - \frac{\rho_s}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{R}(\mathbf{x}) \right] d^3 \mathbf{x} \end{aligned} \quad (14)$$

となる。ここで、格子振動のエネルギーが  $(1/2) nm (\rho_n/\rho) v^2$  と書け (9) より), 格子の運動にともなう粒子が格子点をとびうつる逆向きの流れ  $-nm (\rho_s/\rho)$  が生ずること (10) より) を考慮して、かわりに (5) の第二項にあたる項をおとした。平均場近似で  $\rho_s$  は

$$\left( \frac{\rho_s}{\rho} \right)_{\alpha\beta} = - \frac{N_0}{N} \sum_j \frac{m}{\hbar^2} t_{ij} R_{ij}^\alpha R_{ij}^\beta \quad (15)$$

であたえられる。W を基底状態からのずれについて展開し、運動方程式としては古典的な磁性体と弾性体のものを採用する。

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{S}_\alpha(x) = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_\beta(x) H_\gamma(x), \quad H_\gamma(x) = - \frac{\delta W}{\delta S_\gamma(x)} \end{array} \right. \quad (16)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\rho_n}{\rho} m \left( \frac{1}{2} + S_3(x) \right) \ddot{u}_i(x) = \frac{\partial P_{ij}(x)}{\partial x_j}, \quad P_{ij}(x) = \frac{\delta W}{\delta u_{ij}(x)} \end{array} \right. \quad (17)$$

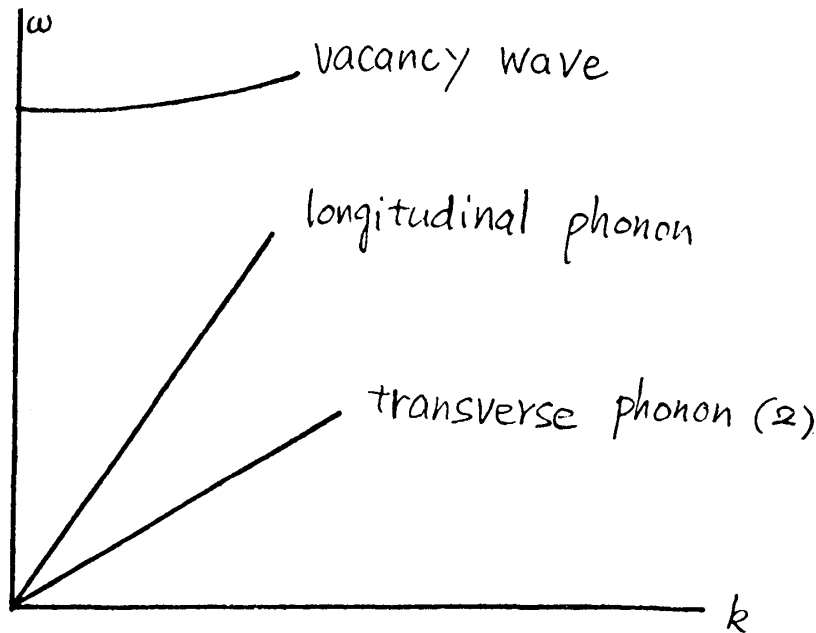


図 1. 完全結晶での励起スペクトル

得られる長波長領域でのスペクトルは図 1, 2 のようなものである。完全結晶の場合は  $\rho_s = 0$  で通常フォノンとギャップをもった vacancy wave が存在しギャップ  $\Delta$  は

$$\Delta = P\bar{v} - \frac{1}{2} \sum_j v_{ij} + \sum_{j(\neq i)} t_{ij} \quad (18)$$

であたえられる ( $\bar{v}$  は 1 粒子の体積,  $t_{ij} < 0$ )。  $\Delta < 0$  の場合には, マクロな数の vacancy が出現しそれが Bose 凝縮をおこす。

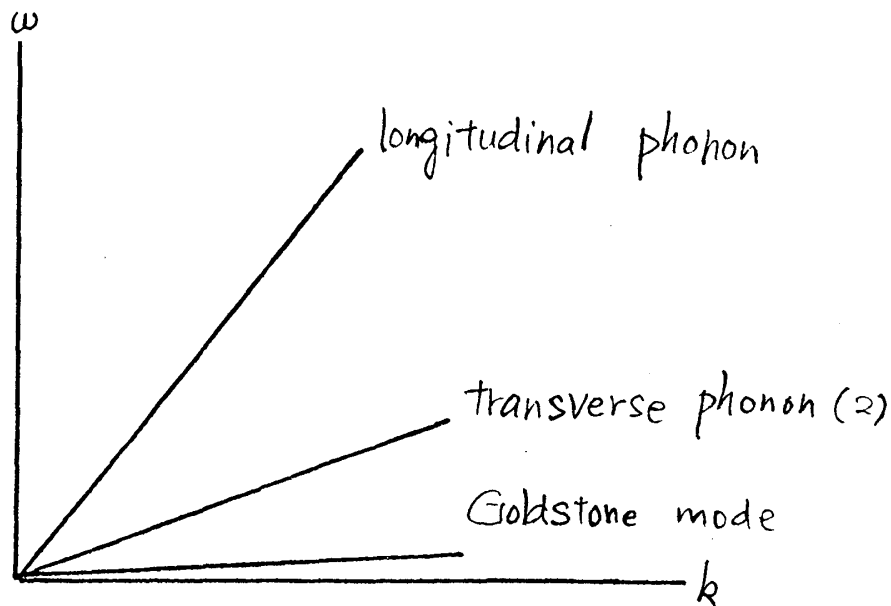


図 2.. Vacancy が Bose 凝縮した相での励起スペクトル

このときの  $\rho_s$  は (15) で  $N_0/N = (L-N)/L$  ( $L$  は格子点の数) である。3 つの格子振動のほかに, 音波型の凝縮体の振動のモードが出現する。これは位相対称性の破れによる Goldstone モードである。従フォノンと結合しており, 音速は  $\rho_s$  に比例している。

### § 3. 2, 3 の問題

結晶内で「超流動」はどういう場合に可能だろうか。同じ局在 1 粒子状態に 2 つ以上の粒子がこれない場合について次のことがわかっている。(Matsuda と Tsuneto<sup>5)</sup>)

- ① 隣の格子点の状態と大きな重なりがあっても完全結晶ならば ODLRO はない。
- ② 有限濃度の vacancy があれば ODLRO がある。(  $T=0$  )

このことは ODLRO にとって波動関数の重なりよりも対称化が本質的であることを示している<sup>6)</sup>。基底状態で零点 vacancy が固体ヘリウムで実際に存在するかどうかについて、古典的なハード・コア系と Feynman 波動関数との対応で vacancy 濃度が  $10^{-4}$  程度という予想<sup>7)</sup>があるが、運動エネルギーの効果が正しくとりいれられているとは言えない。実験は高温でだが数 K のエネルギー・ギャップがあるとされており否定的<sup>8)</sup>のようである。

これとは別に Leggett<sup>9)</sup> は Bose 凝縮の存在をあらわにつかわずに  $\rho_s$  の定義をあたえ、結晶中の  $\rho_s$  の上限として

$$\frac{1}{\rho_s} \geq \frac{1}{L_x} \int_0^{L_x} \left[ \frac{1}{L_y L_z} \int \rho \, dy \, dz \right]^{-1} dx \quad (19)$$

をえた。Saslow<sup>10)11)</sup> はこれをもとに波動関数のひろがり  $\rho_s$  の関係を調べ、ヘリウム固体でも  $\rho_s \sim 0.1$  であると主張している。しかし (19) はあくまで上限であって、正しい値を知ろうとすれば粒子の相関をとりいれる必要がある。<sup>12)</sup> このことは前の例からも明らかであろう。

格子模型にかえてみると、2重占拠が可能ならば vacancy がなくても  $\rho_s$  はありうる。このとき  $\rho_s$  はだいたい交換相互作用の大きさで決まると思われ、 $^4\text{He}$  固体では  $\rho_s/\rho \sim 10^{-5}$ ,  $T_c \sim 10 \mu\text{K}$  の程度になる。<sup>8),9)</sup>

励起スペクトルについては Andreev 達<sup>1)</sup> が最初に hydrodynamics をつくって 4 つの音波 (3 つの格子振動と 1 つの  $\rho_s$  の運動) をえており、Bose 粒子系の Green 関数の理論を一様性が破れ周期性があらわれた場合に拡張した Dzyaloshinskii 達<sup>13)</sup> も同様の結果を得ている。また Matsuda-Tsuneto の 2 副格子模型からもギャップのない音波型のスペクトルがえられる。<sup>14)</sup> この 4 番目のモードは格子振動を仮想的にとめた場合には  $\rho_s$  の運動であって第 4 音波に相当する。超流動相の実験的検証にはこのモードを探すのが最もたしかであろう。格子振動の方は逆に  $\rho_n$  の有効質量をもっている。ただ Saslow<sup>11)</sup> はこの点に異議をさしはさみ、 $v_s$  は Galilei 変換をうけないとして hydrodynamics を再構成しその結果、 $\rho_n$  ではなくて  $\rho$  になると主張している。この場合には格子振動にともなう逆向きの流れを生じない。(これは Saslow がよりどころとしている Leggett<sup>9)</sup> の  $\rho_s$  の



定義とは矛盾するように思われるのだが)。

### 参 考 文 献

- 1) A. F. Andreev and I. M. Lifshitz, Sov. Phys. JETP **29**, 1107 (1969)
- 2) G. V. Chester, Phys. Rev. A **2**, 256 (1970)
- 3) W. J. Mullin, Phys. Rev. A **4**, 1247 (1971)
- 4) T. Matsubara and H. Matsuda, Prog. Theor. Phys. **16**, 569 (1956)
- 5) H. Matsuda and T. Tsuneto, Prog. Theor. Phys. suppl. **46**, 411 (1970)
- 6) Y. Imry and M. Schwartz, J. Low Temp. Phys. **21**, 543 (1975)
- 7) A. Widom and D. P. Locke, J. Low Temp. Phys. **23**, 335 (1976)
- 8) R. A. Guyer, Phys. Rev. Lett. **26**, 174 (1971)
- 9) A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **25**, 1543 (1970)
- 10) W. M. Saslow, Phys. Rev. Lett. **36**, 1151 (1976)
- 11) W. M. Saslow, Phys. Rev. **B15**, 173 (1977)
- 12) J. F. Fernández and M. Puma, J. Low Temp. Phys. **17**, 131 (1974)
- 13) I. E. Dzyoloshinskii and P. S. Kondratenko, Sov. Phys. JETP **40**, 1195 (1974)
- 14) K-S. Liu and Fisher, J. Low Temp. Phys. **10**, 655 (1973)

### 周期場中の超流動性

名大理 伊 藤 正 和  
三 宅 和 正

§ 1. 最近グラファイトの表面の一様性を利用して、ここに吸着したヘリウム膜の実験的研究が進んできた。そこで解ってきた興味ある事実の一つとして 2・3 層のヘリウム膜も「超流動性」を示すことが挙げられる。ここには、2 次元有限温度では普通の意味での秩序相が存在しないのに、なぜ超流動性が見られるのか、という問題と共に、壁の外場を explicit に考慮することは超流動性をどのように変更するのか、またはしないのか、という bulk な場合には表面効果として無視されている問題がある。ここでは後者について議論する。